

ТЕНЗОРЫ ТЕРМИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ СВЕРХЧИСТЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ γ-1,1-ДИАМИНО-2,2-ДИНИТРОЭТИЛЕНА

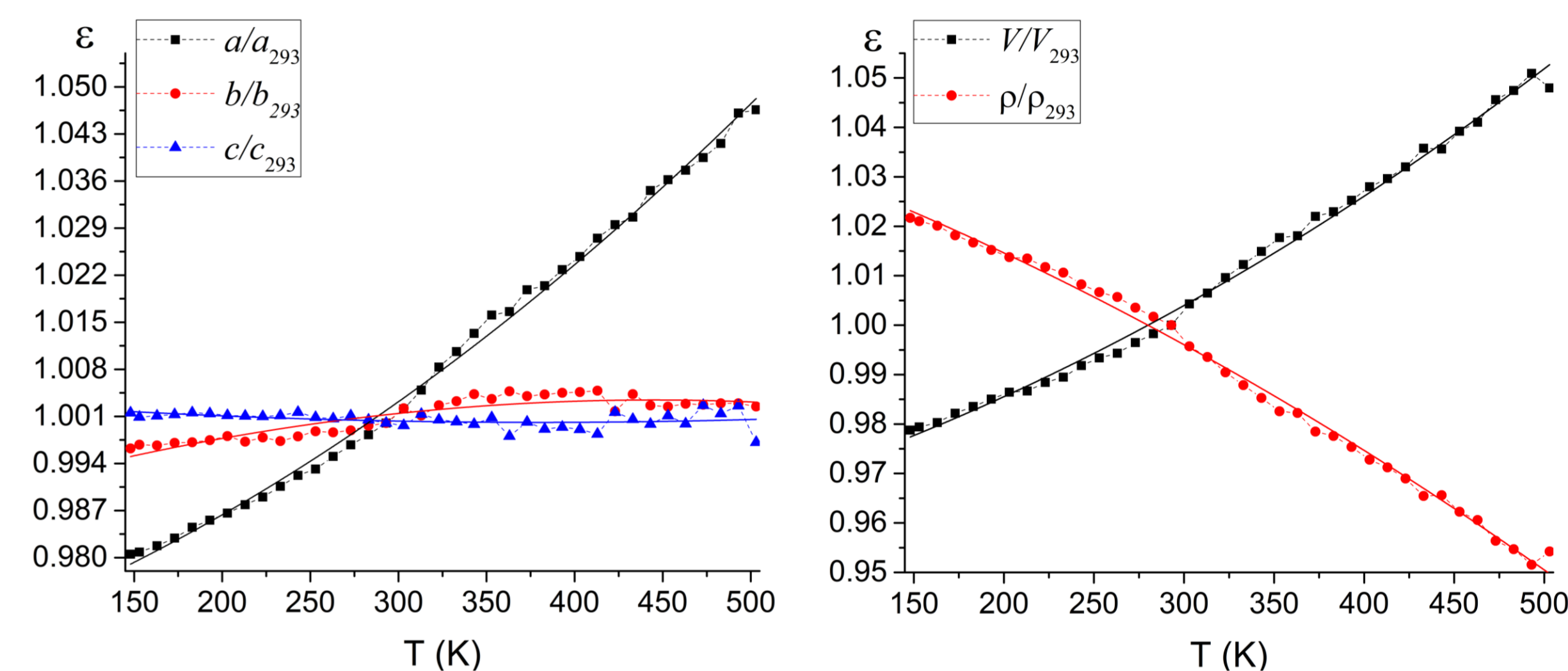
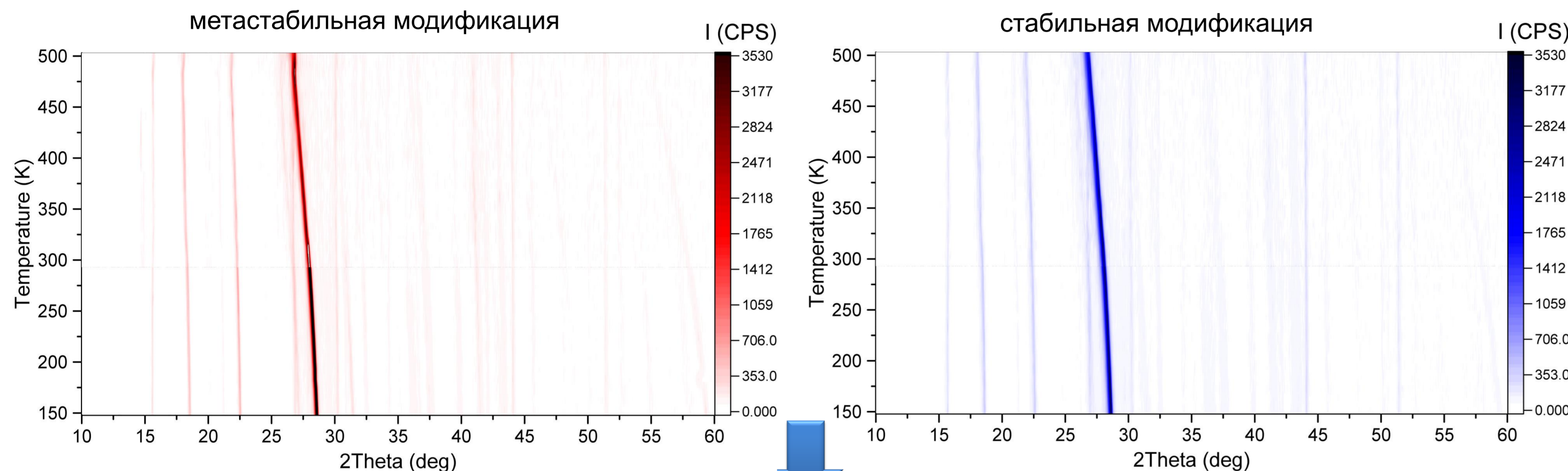
А. В. Станкевич

Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский НИИ технической физики имени академика Е.И. Забабахина», Снежинск, Россия

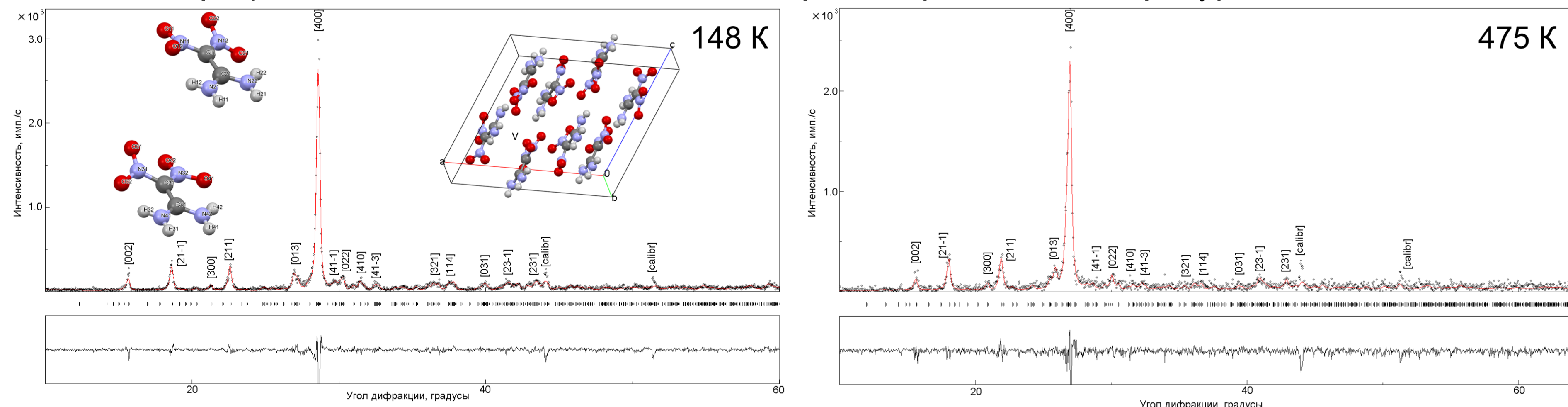
Цель – изучение анизотропной термической деформации γ-ДАДНЭ

Измерения данных дифракции и рассеяния рентгеновских лучей от ДАДНЭ в зависимости от температуры

Зависимость изменения параметров элементарной ячейки от температуры



Полнопрофильный анализ в каждой точке при конкретной температуре

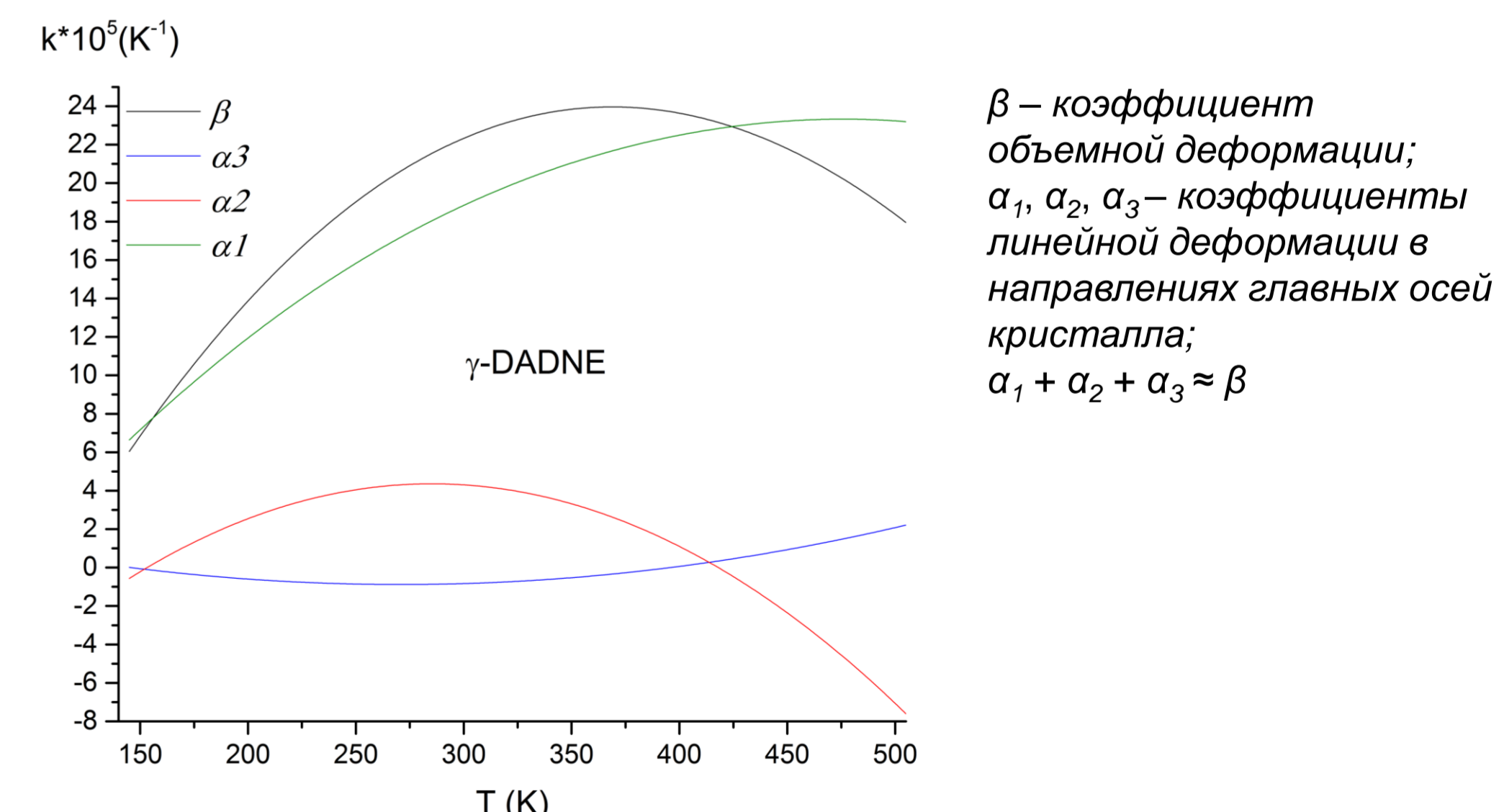


γ-ДАДНЭ₍₂₉₃₎: $P21/n$; $a = 13,630(7) \text{ \AA}$; $b = 6,945(5) \text{ \AA}$; $c = 12,063(8) \text{ \AA}$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$; $\beta = 111,2(8)^\circ$; $Z=8$; $V = 1064,88 \text{ \AA}^3$; $\rho = 1,847 \text{ г/см}^3$; $D = 568 \pm 24$; $e = (2,01 \pm 0,10) \cdot 10^{-3}$; $R_{wp} = 9,7\%$.

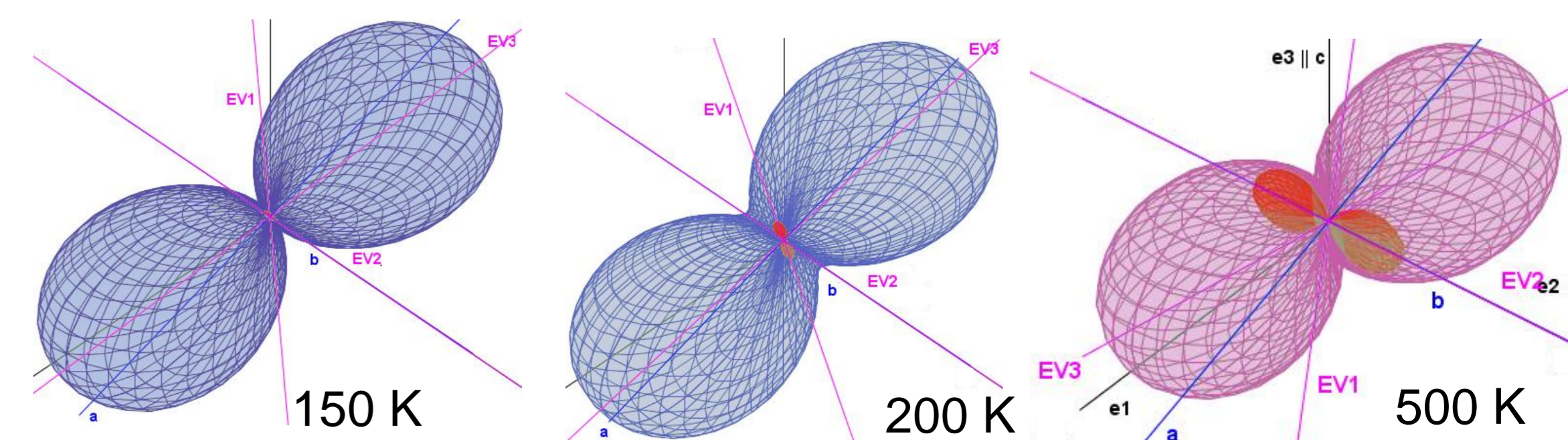
$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \sin(\beta) & 0 & a \cos(\beta) \\ -b \sin(\alpha) \cos(\gamma^*) & b \sin(\alpha) \sin(\gamma^*) & b \cos(\alpha) \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \end{pmatrix} \quad \alpha_{1,2,3} = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{13} & \alpha_{23} & \alpha_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_{(uvw)} = \frac{t}{|t|} = \begin{pmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{V \cdot c |t|} \cdot (ub^* - va^* \cos(\gamma^*)) \\ \frac{v}{b^* |t|} \\ \frac{1}{|t|} \cdot (ua \cos(\beta) + vb \cos(\alpha) + wc) \end{pmatrix}$$

Анизотропная термическая деформация



β – коэффициент объемной деформации;
 $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ – коэффициенты линейной деформации в направлениях главных осей кристалла;
 $\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 \approx \beta$



Вывод

Условный коэффициент анизотропии равен $\eta_{\gamma\text{-ДАДНЭ}} = 18,1$.

- [1] Chemagina I.V., Filin V.P., Loboiko B.G., Kazakova M.B., Shaktorin Y.A., Lagutina V.M., Taibinov N.P., Garmasheva N.V., Alekseev A.V. Investigation of Diaminodinitroethylene (DADNE) Thermal Decomposition// AIP Conf. Proc. – 2005. – 849. – P. 174–178.
- [2] Crawford M.-J., Evers J., Göbel M., Klapötke T.M., Mayer P., Oehlinger G., Welch J.M. γ-FOX-7: Structure of a High Energy Density Material Immediately Prior to Decomposition// Propellants, Explosives, Pyrotechnics. – 207. – 32, №. 6. – P. 478–495.
- [3] Stankevich A.V., Taibinov N.P., Kostitsyn O.V., Garmashev A.Yu. Thermal deformation and polymorphic transitions of 1,1-diamino-2,2-dinitroethylene in the temperature range from 145 to 475 K// J. Phys.: Conf. Ser.. – 2021. – 1787 012006.